

# 温度对镍基单晶高温合金 $\gamma/\gamma'$ 相界面上错配位错运动影响的分子动力学研究

谢红献<sup>1)†</sup> 于涛<sup>2)</sup> 刘波<sup>1)</sup>

1) (河北工业大学机械工程学院, 天津 300132)

2) (钢铁研究总院功能材料研究所, 北京 100081)

(2010年6月7日收到; 2010年7月17日收到修改稿)

用分子动力学方法研究了温度对镍基单晶高温合金  $\gamma/\gamma'$  相界面上错配位错运动的影响. 研究表明: 无论是在低温还是在高温下, 错配位错的运动都是通过扭折的形核及扭折沿位错线的迁移来实现; 在低温时错配位错的相互作用有利于错配位错的运动; 然而在高温时错配位错的相互作用可以阻碍错配位错的运动, 从而阻碍  $\gamma$  和  $\gamma'$  相界面的相对滑动, 有利于提高镍基单晶高温合金的高温力学性能.

**关键词:** 镍基单晶高温合金, 相界面, 错配位错, 分子动力学模拟

**PACS:** 61.72.Lk, 02.70.Ns, 68.35.-p, 61.72.Nn

## 1. 引言

镍基单晶高温合金是目前先进航空发动机和工业燃气轮机涡轮叶片等热端部件的主要用材, 占发动机用材总重的一半以上. 镍基单晶高温合金主要由  $\gamma$  母相 (镍基固溶体) 和  $\gamma'$  析出相 ( $\text{Ni}_3\text{Al}$  金属间化合物) 两相组成.  $\gamma'$  相作为强化相, 其体积百分比高达 70%. 经过热处理后,  $\gamma'$  相与  $\gamma$  相形成共格结构<sup>[1-3]</sup>. 由于二者的晶格常数略有差异, 在共格界面上会产生错配位错. 人们已经通过实验观察到了错配位错的存在<sup>[4,5]</sup>; 并用分子动力学方法, 在原子尺度上研究了不同晶向的相界面<sup>[6,7]</sup> 及同一晶向相界面上不同原子堆垛结构<sup>[8]</sup> 对错配位错形态的影响.  $\gamma/\gamma'$  相界面广泛地存在于镍基单晶高温合金中, 且  $\gamma/\gamma'$  相界面上的错配位错对镍基单晶高温合金的力学性能有重要的影响.

晶体中位错的运动会使晶体发生塑性形变, 所以在外应力下位错如何运动引起了人们广泛地关注和深入地研究. 关于位错的运动机理, 很早以前就有人提出扭折假说<sup>[9]</sup>. 因为用实验直接观察原子尺度的位错结构及运动非常困难, 所以分子动力学模拟就成为在原子尺度上探索位错结构及运动的强有利手段<sup>[10-15]</sup>. Cheng 等<sup>[10,11]</sup> 模拟了 bcc Mo 中

刃型和螺型位错在外应力下的运动, 认为在低温下刃型位错通过扭折形核的方式运动, 而螺型位错通过扭折迁移的方式运动. Marian<sup>[12]</sup> 模拟了 bcc 铁中螺位错在外应力下的运动, 首次观察到位错运动的扭折机理. 最近我们用分子动力学方法模拟了  $\gamma/\gamma'$  相界面上的错配位错在外应力下的运动规律<sup>[13]</sup>, 模拟结果表明: 在低应力加载时, 错配位错通过扭折迁移的方式运动; 在高应力加载时, 错配位错的运动受到层错的阻碍; 在这两种应力下, 扭折和层错的形核位置都在错配位错的交点上. 但该工作只研究了低温 (5 K) 下错配位错的运动规律, 没有给出温度对错配位错运动规律的影响. 基于上述背景, 本文用分子动力学的方法对错配位错运动的温度依赖性进行了研究, 同时对模拟的结果进行了能量学分析.

## 2. 模拟模型与方法

实验表明,  $\gamma$  和  $\gamma'$  两相转变发生在 [010] 方向上<sup>[16]</sup>, 基于此, 我们构建了 (010) 相界面的错配位错模型. 当  $\gamma$  相和  $\gamma'$  相晶格的取向一致时, 基于重位点阵 (coincidence site lattice) 的思想, 写出如下关系式:

$$na_{\gamma'} = (n+1)a_{\gamma},$$

† E-mail: hongxianxie@163.com

其中  $a_\gamma$  和  $a_{\gamma'}$  分别为  $\gamma$  和  $\gamma'$  相的晶格常数, 把  $a_\gamma = 3.52 \text{ \AA}$  和  $a_{\gamma'} = 3.573 \text{ \AA}$ <sup>[14]</sup> 代入上式, 由此得到  $n \approx 66$ , 这意味着, 在 66 个  $\gamma'$  相晶格与 67 个  $\gamma$  相晶格形成的错配界面范围内, 因晶格常数的差异而产生的应力刚好抵消.

根据以上讨论和计算, 我们建立了 (010) 相界面模型. 模型三个轴的取向分别为  $x = [101]$ ,  $y = [10\bar{1}]$  和  $z = [010]$ ; 整个模型被一个 (010) 晶面分成上下两部分, 上半部分是 Ni, 大小为  $67[101]$ ,  $67[10\bar{1}]$  和  $11[010]$ ; 下半部分是  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , 大小为  $66[101]$ ,  $66[10\bar{1}]$  和  $11[010]$ , 体系的总原子数为 778360 个.

首先要弛豫得到  $\gamma/\gamma'$  相界面上的错配位错构型. 对上面构建的模型在  $X$  和  $Y$  方向利用周期性边界条件, 在  $Z$  方向利用自由边界条件; 体系所加温度为 5 K, 采用的时间步长为  $\Delta t = 5 \times 10^{-15} \text{ s}$ , 在弛豫的过程中监视体系能量的变化, 当体系能量不再随时间变化时, 体系就达到了稳定状态, 这时就会在相界面上形成如图 1 中“井”字形的错配位错<sup>[13]</sup>. 从图中可以看到, 平行位错之间的间距为 16.68 nm.

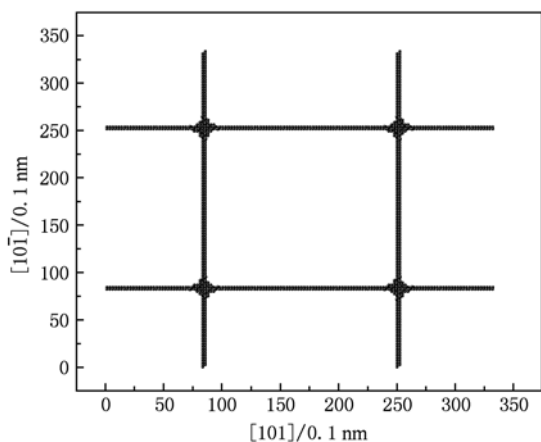


图 1  $\gamma/\gamma'$  相界面错配位错的构型

通过弛豫得到体系的错配位错模型之后, 为了模拟错配位错在外应力下的运动过程, 我们对体系的上下两个表面几层原子施加切应力  $\tau_{zx} = 501 \text{ MPa}$  (见图 2). 模型在  $x$  和  $y$  方向上利用周期性边界条件; 分子动力学中求解牛顿运动方程采用的是 Gear 算法, 时间步长取为  $\Delta t = 5 \times 10^{-15} \text{ s}$ . 加载过程中保持体系温度不变, 即在 MD 模拟中经过一定的时间步长后, 需对原子的速度重新进行标定以达到设定的温度. 在模拟中采用的原子间相互作用势是 Voter

和 Chen 的 EAM 势<sup>[17]</sup>. 该 EAM 比较成功地应用在对 Ni-Al 体系的研究中<sup>[18-21]</sup>. 因此, 我们运用该 EAM 势进行模拟计算和能量分析是可靠的.

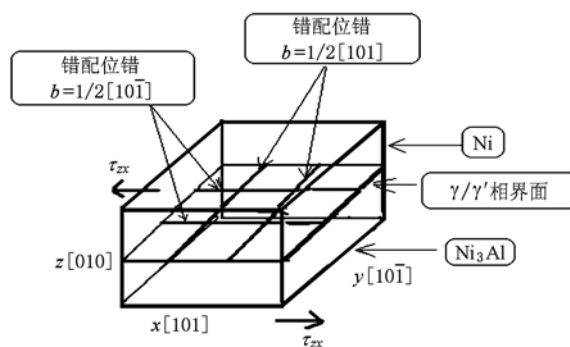


图 2  $\gamma/\gamma'$  相界面错配位错在切应力下的模拟模型图

### 3. 结果与讨论

#### 3.1. 温度对错配位错运动的影响

为了研究温度对错配位错运动的影响, 我们分别模拟了温度为 400, 600, 900 K, 时错配位错在外应力作用下的运动过程. 在切应力的作用下, 四条错配位错线中只有和  $y$  坐标轴平行的两条错配位错线可沿  $x$  负方向运动, 且错配位错线的四个交点附近错配位错的运动情况完全相同, 所以在下面的分析中我们只给出了一个交点处错配位错的运动情况.

图 3 给出温度为 400 K 时界面错配位错的运动情况. 从图中可以看到扭折的形核及迁移过程: 在时间为 3.0 ps 时, 整个位错线平直地躺在 Peierls 能谷中; 3.1 ps 时, 两个位错线交叉点附近的那部分位错线首先越过 Peierls 势垒到达了下一个能谷, 从而形成了原子尺度大小的双扭折; 在切应力的作用下, 扭折沿着位错线快速向两边迁移 (3.2 ps); 最终和相反符号的扭折湮没, 导致位错线向前移动一个伯格矢量 (3.3 ps). 我们的模拟工作表明: 400 K 时, 错配位错的运动由扭折的形核及迁移过程控制; 且扭折首先在错配位错的交叉点处形核, 即相互垂直的错配位错之间的相互作用可以促进错配位错的运动.

图 4 给出温度为 600 K 时界面错配位错的运动过程. 从图中可以看到: 错配位错的运动仍然是通过扭折形核和扭折沿位错线向两边迁移, 从而带动整个位错线的运动. 但扭折形核的位置并不在位错

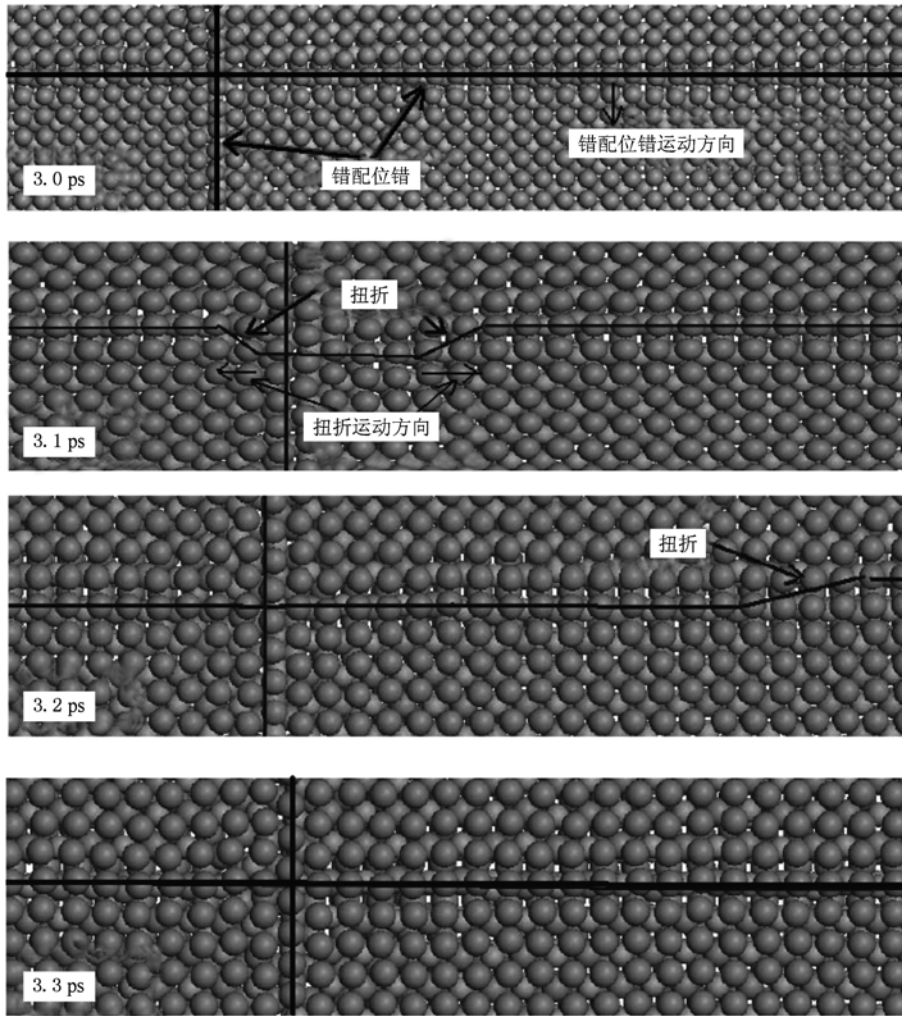


图3 温度为 400 K 时错配位错的运动过程

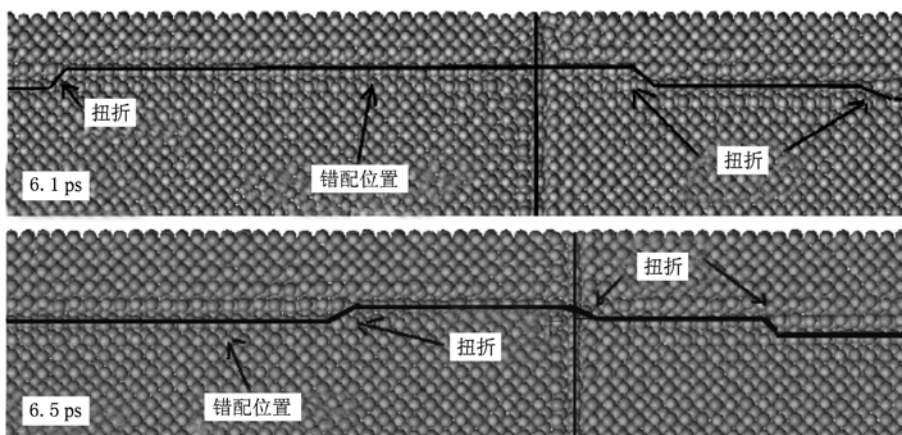


图4 温度为 600 K 时错配位错的运动过程

的交点处,而是在位错线的其他部分,这说明扭折不是通过彼此垂直的位错线的相互作用形成的,而

是通过热激发产生的;600 K 时错配位错处于交点附近的的部分总是滞后于其他部分,这说明错配位错

的交点阻碍了整个错配位错的运动. 900 K 时(图 5) 错配位错的运动情况和 600 K 时类似, 只是错配位错处于交点附近的部分更加滞后于其他部分, 这

说明当温度升高时, 错配位错的交点对整个错配位错运动的阻碍作用更加强烈.

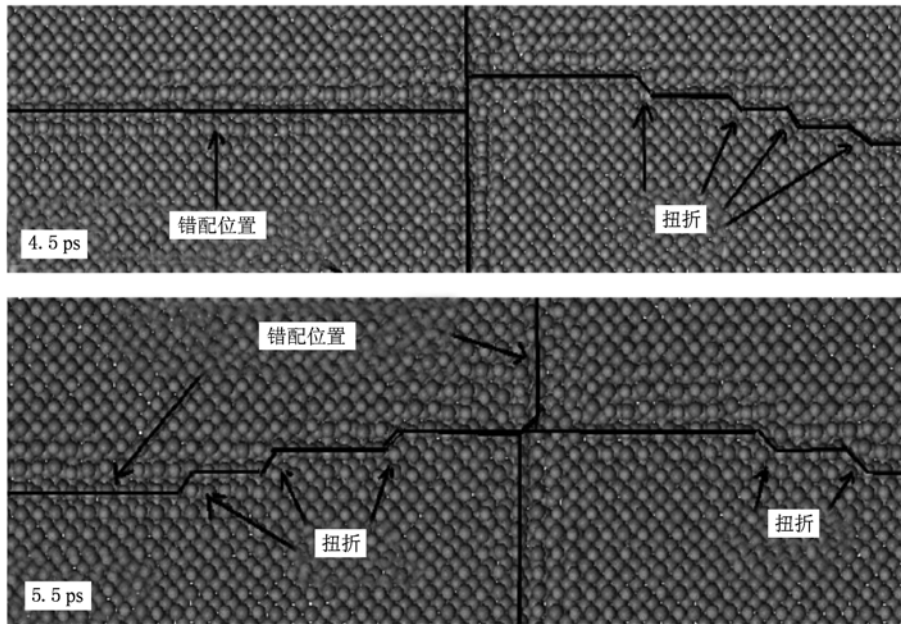


图 5 温度为 900 K 时错配位错的运动过程

为了研究错配位错交点阻碍错配位错运动的原因, 我们详细研究了温度 600 K 和 900 K 错配位错运动时错配位错交叉点处的原子结构. 经研究发现在错配位错交叉点的前面产生了一个位错环, 位错环的运动留下一片层错(图 6). 从图 6 可以看到: 在  $(11\bar{1})$  平面上, 半个  $1/6[112]$  位错环已从错配位错芯区被发射出来, 在位错环经过的地方留下一片堆垛层错; 正是这片层错阻碍了错配位错交叉部分的运动. 导致错配位错处于交点附近的部分滞后于其他部分.

### 3.2. 模拟结果的能量学分析

从以上的模拟中可以发现相互垂直的错配位错的相交部分在位错的运动过程中起到关键作用. 在 400 K 时扭折首先在该处形核, 从而促进错配位错的运动; 但在 600 K 和 900 K 时由于在该处产生位错环(位错环的运动留下层错), 从而阻碍了错配位错的运动. 为了探索其中的原因, 我们对错配位

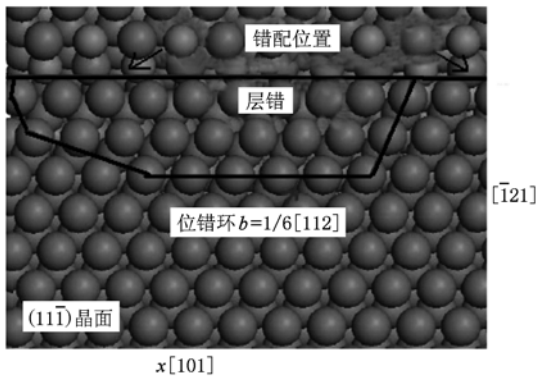


图 6 错配位错交线前产生的位错环

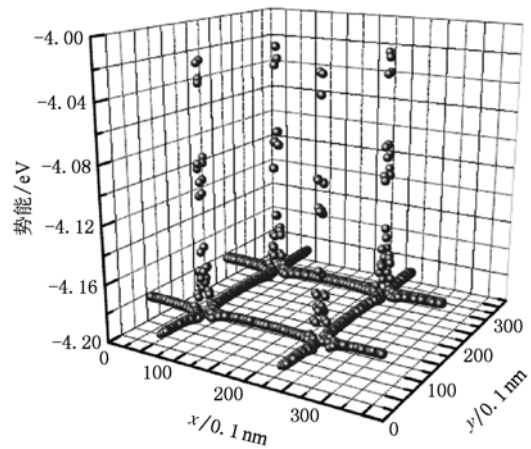


图 7 错配位错线上原子的势能

错进行了能量学分析. 图 7 给出了位于四条错配位错线上原子的势能. 从图中可以看到: 位于四条错配位错交点上的原子势能为  $-4.02$  eV, 而错配位错其它部分上的原子势能为  $-4.19$  eV, 前者比后者高  $0.17$  eV. 众所周知, 较高的原子势能可导致该处的原子键合作用减弱, 从而降低了该处位错运动的 Peierls 势垒及产生新位错环的势垒, 使扭折及位错环更容易在该处产生.

由位错理论可知<sup>[9]</sup>, 扭折的形成能比位错整体运动的 Peierls 势垒要低, 而创生一对新位错所需要的能量比位错整体运动的 Peierls 势垒要高, 所以位错环的形成能垒高于扭折的形成能垒. 在较低温时, 热激活作用比较弱, 不足以在错配位错交点以外的部分上产生扭折, 所以扭折首先在 Peierls 势垒较低(即错配位错交点)处产生, 然后沿位错线迁移, 带动整个位错线向前运动. 这时由于位错环的形成能较高而不产生位错环.

当温度升高时, 由于热激活作用, 首先会在位错线的交点处及位错线的其他部分产生扭折, 同时在位错交叉点的前面、垂直于运动位错的位错线上产生位错环(位错环的运动留下层错), 当位错交点运动到层错处时, 由于受到层错的阻碍, 提高了该

处的 Peierls 势垒, 从而使扭折在随后的运动中不能在该处形核, 扭折在位错线的其他部分由热激活形核, 然后沿位错线迁移, 从而带动整个位错线向前运动.

#### 4. 结 论

本文用分子动力学方法研究了温度对镍基单晶高温合金  $\gamma/\gamma'$ (001) 相界面上错配位错运动的影响. 研究表明: 无论是在高温还是在低温下, 错配位错的运动都是通过扭折的形核及沿位错线的迁移来实现; 在温度为 400 K 时, 扭折首先在错配位错交叉处产生, 然后沿位错线迁移, 交叉点的存在有利于错配位错的运动; 当温度大于或等于 600 K 时, 在错配位错交叉点的前方可产生层错, 从而阻碍错配位错的运动. 因为  $\gamma/\gamma'$  相界面广泛地存在于镍基单晶高温合金中,  $\gamma/\gamma'$  相界面上的错配位错的运动可以引起相界面的相对滑动, 使镍基高温合金产生形变. 而镍基高温合金主要应用在环境温度高于 600 K 的情况下, 这时错配位错交点的存在可以阻碍位错的运动, 从而阻碍  $\gamma$  和  $\gamma'$  相界面的相对滑动, 有利于提高镍基单晶高温合金的高温机械强度.

- [1] Khan T, Caron P 1986 *Mater. Science and Technology* **2** 486
- [2] Harris K, Erickson G L, Schwer R E 1986 *High Temperature Alloys for Gas Turbines and Other applications* edited **20** 709
- [3] Erickson G L in *Superalloys* 1996 edited by R D Kissinger, (The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale USA 1996) p35
- [4] Lahrman D F, Field R D, Darolia R, Fraser H L 1988 *Acta Metal.* **36** 1309
- [5] Gabb T P, Draper S L, Hull D R, Nathal M V 1989 *Mater. Sci. Eng. A* **118** 59
- [6] Zhu T, Wang C Y 2005 *Phys. Rev. B* **72** 014111
- [7] Wen Y H, Zhu T, Cao L X, Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 (in Chinese) [文玉华、朱 弢、曹立霞、王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520]
- [8] Geng C Y, Wang C Y, Zhu T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1320 (in Chinese) [耿翠玉、王崇愚、朱 弢 2005 物理学报 **54** 1320]
- [9] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of dislocations* (Wiley, New York, 1982)
- [10] Chang J P, Cai W, Bulatov V V, Sidney Yip 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **309** 160
- [11] Chang J P, Cai W, Bulatov V V, Sidney Yip 2002 *Computational Materials Science* **23** 111
- [12] Jaime Marian, Cai W, Bulatov V V 2004 *Nature Mater* **3** 158
- [13] Xie H X, Wang C Y, Yu T 2009 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **17** 055007
- [14] Zhu T, Wang C Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 1009
- [15] Chen L Q, Wang C Y, Yu T 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1674
- [16] Zhang Y, Wanderka N, Schumacher G, Schneider R W, Neumann W 2000 *Acta Mater* **48** 2787
- [17] Voter A F, Chen S P 1987 *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys* (MRS Symposia Proceedings No. 82) ed R W Siegel (Pittsburgh: Materials Research Society) p175
- [18] Mao W, Lin D L 1997 *Acta Materialia* **45** 1005
- [19] Rey C, Garcia-Rodeja J, Gallego L J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2942
- [20] Farkas D, Roqueta D, Vilette A, Ternes K 1996 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **4** 359
- [21] Xie H X, Wang C Y, Yu T, Du J P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1674

# Effect of temperature on motion of misfit dislocation in $\gamma/\gamma'$ interface of a Ni-based single-crystal superalloy: molecular dynamic simulations

Xie Hong-Xian<sup>1)†</sup> Yu Tao<sup>2)</sup> Liu Bo<sup>1)</sup>

1) (School of Mechanical Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300132, China)

2) (Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100081, China)

(Received 7 June 2010; revised manuscript received 17 July 2010)

## Abstract

The effect of temperature on motion of misfit dislocation in the  $\gamma/\gamma'$  interface of a Ni-based superalloy is studied in periodic simulation cells subjected to an applied shear stress. The simulation results show that no matter what temperature is, the motion of misfit dislocation occurs through the nucleation and the propagation of the double kink; at low temperature, the interaction of the misfit dislocation facilitates the motion of the misfit dislocation; on the contrary, at higher temperature, it can obstruct the motion of the misfit dislocation, and improves the mechanical properties of nickel-base superalloys.

**Keywords:** Ni-based single superalloys, interface, misfit dislocation, molecular dynamics simulation

**PACS:** 61.72.Lk, 02.70.Ns, 68.35.-p, 61.72.Nn

---

† E-mail: hongxianxie@163.com